

Strömungen in Schüttungen und Faserbündeln

Christian Jordan, Georg Paul, Connor Flannery, Anton Friedl und Michael Harasek
Institut für Verfahrenstechnik,
Brennstofftechnik und Umwelttechnik an der TU Wien

15. Dezember 2001

Zusammenfassung

Im Hinblick auf eine Optimierung des Designs sollte das Strömungsverhalten in Dialyse- und Chromatographiemodule berechnet werden. Einer der Schwerpunkte dieser Analyse war auch die Frage, in wie weit Membranen und poröse Schüttungsschichten vereinfacht abgebildet werden können, um dennoch richtige Aussagen für An- und Abströmbereiche zu erhalten.

1 Allgemeines

Die numerische Strömungssimulation (Computational Fluid Dynamics, CFD) erlebt in Zeiten laufend steigender Rechnerleistung einen schwunghaften Aufstieg als Ersatz und Ergänzung von oft teuren und aufwendigen Modellversuchen (beispielsweise im Windkanal), wie auch in [1] ausgeführt wird. Neben Zeit- und Kostenersparnis in der Anlagenplanung ist es auch möglich, das Anlagenverhalten nach apparatebaulichen Veränderungen im Zuge von Geometrieoptimierungen in verschiedenen Betriebszuständen vorherzusagen.

Dies ist aber nicht die einzige Anwendung. Insbesondere bei internen Strömungen in kleineren, der Messung schwer zugänglichen Bauteilen, wie Chromatographiemodule, kann die CFD einen wertvollen Beitrag zum besseren Verständnis der Strömungsvorgänge geben.

2 Hardware-Voraussetzungen

Die Simulationsrechnungen wurden auf zentralen Rechnern des ZID der TU Wien durchgeführt, wahlweise auf einem der beiden Knoten im Cluster "fecfd", fe.zserv.tuwien.ac.at und cfd.zserv.tuwien.ac.at, beides Multiprozessor-Alpha-Systeme (Compaq) mit entsprechender Hauptspeicherausstattung (etwa 1,5 GB RAM pro CPU).

Als Betriebssystem wird Tru64 Unix verwendet. Die Systeme sind auch in der Lage, auf Basis von SMP (symmetric multiprocessing) Aufgaben auf mehrere CPUs aufzuteilen, um die Berechnungszeit zu verkürzen.

3 Software

Für die hier vorliegende Arbeit wurde der kommerzielle Finite-Volumen-Solver FLUENT der amerikanischen Firma FLUENT Inc. verwendet, der die Grundgleichungen (Impulsbilanz, Massenbilanz, Energiebilanz sowie bei Bedarf auch Spezies-Bilanzen) für jedes der einzelnen Kontrollvolumina im zwei- oder dreidimensionalen Netz einzeln integriert und löst. Für diese Arbeit wurden stationäre und auch instationäre Berechnungen durchgeführt, wobei die Programmversionen FLUENT 5.4.x beziehungsweise 5.5.x zum Einsatz kamen.

Das rechnerische dreidimensionale Abbild der Anlage wurde mit dem ebenfalls von FLUENT Inc. vertriebenen "CFD-Preprocessor" namens GAMBIT (verwendete Version: GAMBIT 1.3), einem einfachen

CAD-Programm kombiniert mit der Möglichkeit, die Rechengitter zu generieren, erstellt. Aufgrund der Komplexität der zu simulierenden Objekte mußte in manchen Bereichen auf unstrukturierte, tetraedrische Gitter zurückgegriffen werden, die erhöhte Flexibilität mußte allerdings mit vergrößertem rechnerischen Aufwand "bezahlt" werden.

Die Turbulenz, sofern überhaupt vorhanden, wurde mittels eines modifizierten k - ϵ -Ansatzes (siehe [4]) modelliert, über weite Strecken konnte aber auch ein laminares Fluidmodell zum Einsatz kommen, insbesondere in den Bereichen mit porösem Medium. Die Fluide wurden als inkompressibel mit konstanten Stoffdaten angenommen, auch konnte vorausgesetzt werden, daß die Vorgänge isotherm ablaufen und kein Energieaustausch über die Wände erforderlich ist.

Die Modelle enthalten je nach verwendeter Gitterdichte etwa 100000-400000 Zellen und haben einen Hauptspeicherbedarf von ca. 150-800 MB. Die Rechenzeit beläuft sich auf 1 bis 4 Minuten pro Iteration, je nach aktivierten Modellen. Bis zur Konvergenz wurden zwischen 200-1000 Iterationen benötigt.

4 Chromatographiemodul

Voraussetzung für eine ordnungsgemäße Verteilung des Aufgabefluids über die chromatographisch wirksame Packung ist natürlich grundsätzlich - neben einer ordnungsgemäß ausgeführten Packung - ein entsprechend hoher Strömungswiderstand in der Packung. Sonst kommt es zu Strähnenbildung oder einer ausgeprägten Kernströmung und nahezu ruhender Strömung am Rand, welche in verminderter Stoffaustauschleistung führt.

Da aber ein hoher Strömungswiderstand auch mit hohem Druckverlust einhergeht, welcher aus ökonomischer und auch apparatetechnischer Sicht zu vermeiden ist, fällt der fluiddynamisch günstigen Gestaltung des Zustrombereiches große Bedeutung zu.

Zumeist wird eine Lösung mit einer porösen Platte (beispielsweise aus Keramik, Glas oder Sintermetall) gewählt, kombiniert mit einem angemessenen Strömungskanal, um auch hinreichend Fluid in die Außenbereiche zu führen.

Bei ungünstigem Säulendesign kann es aber auch auftreten, daß nicht die gesamte Schüttung als Anströmfläche offen liegt, was ebenfalls wieder zu Totbereichen führt, die einerseits nicht für den Stoffaustausch zur Verfügung stehen und andererseits insbesondere in der pharmazeutischen oder biotechnologischen Anwendung große Infektionsgefahren (Toträume) birgt.

Weitere Aspekte dieser Problematik können bei [2] nachgelesen werden.

4.1 Geometrie

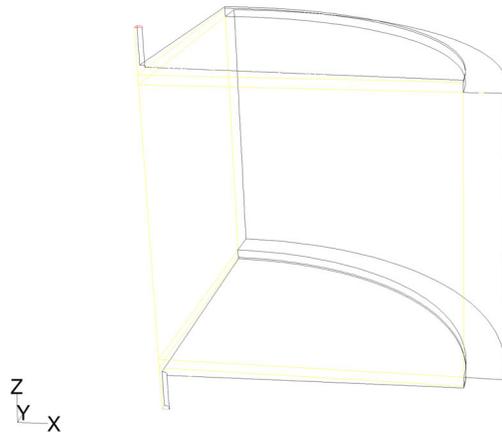
Es soll hier der Vergleich zwischen einem Chromatographiemodul mit und einem ohne Totbereich durchgeführt werden. Zur Vereinfachung der Rechnung werden die zwei Symmetrieachsen des Moduls ausgenützt und nur 1/4 der Geometrie tatsächlich simuliert, was in Abbildung 1 dargestellt ist.

4.2 Parameter

Vorgegeben ist der Volumenstrom und in diesem Fall auch der Druckabfall über die chromatographische Säule. Die Simulation soll mit den Stoffdaten von Wasser durchgeführt werden. Als Anpassungsparameter bleibt daher natürlich nur noch der Schüttungswiderstand. Dieser kann beispielsweise mit folgenden Gleichungen vor der Simulation abgeschätzt werden:

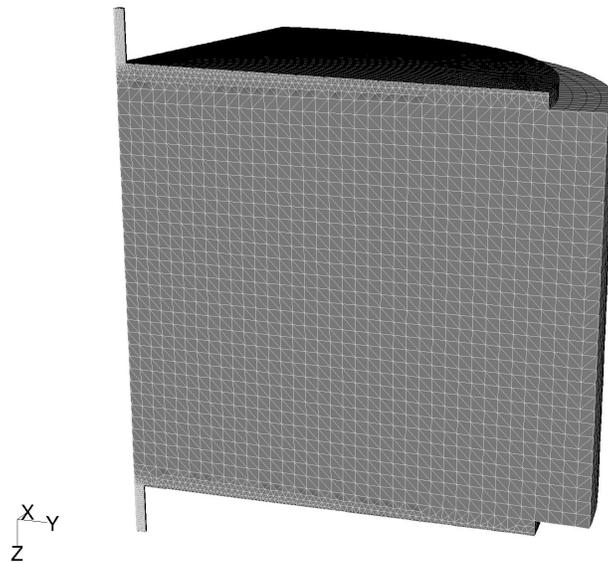
$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \cdot \frac{\epsilon}{(1 - \epsilon)^2}$$
$$C_2 = \frac{3,5}{D_p} \cdot \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon^3}$$

Der erste Ausdruck gibt die "viscous resistance" an, direkt proportional der Geschwindigkeit, der zweite Wert stellt die "inertial resistance" dar, proportional dem Quadrat der Strömungsgeschwindigkeit.



Grid	FLUENT 5.7 (3d, dp, segregated, lam)
------	--------------------------------------

Abbildung 1: Darstellung des Rechenbereiches



Grid	FLUENT 5.3 (3d, dp, segregated, spe2, lam)
------	--

Abbildung 2: Gitter für die Simulation

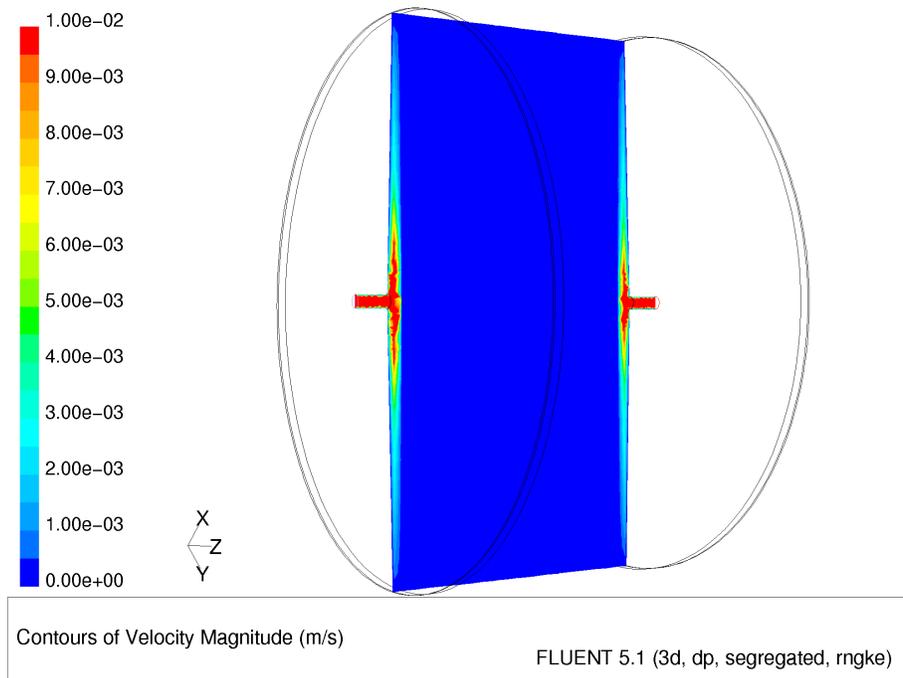


Abbildung 3: Geschwindigkeitsprofil im Chromatographiemodul, Absolutgeschwindigkeit in m/s

4.3 Darstellungen und Auswertungen

Die Durchbruchkurve (siehe Abbildung 4) gibt das klassische Bild eines Rohrreaktors wieder (Verweilzeit). Ideal müßte ein Konzentrationssprung auftreten, die Nichtidealität zeigt sich in der realen Steigung und in den Krümmungen bei den Übergangszonen.

Ideal müßte die Iso-Fläche exakt eine Ebene bilden. In der Mitte des Moduls bemerkt man, daß eine Ausbuchtung nach unten auftritt, die aufgrund der aufprallenden Anströmung auftritt. In den Randzonen sieht man aufgrund der Haftbedingung den Rückhalt des Fluides.

Im Vergleich der Iso-Flächen (siehe Abbildungen 6 und 7) merkt man sehr deutlich die Auswirkung des schlecht angeströmten Mantelbereiches. Dies wirkt sich natürlich auf das Verweilzeitverhalten der Stoffe in der Säule aus. Die chromatographische Trennung einer solchen Säule ist demzufolge auch schlechter als bei günstigerer Anströmung.

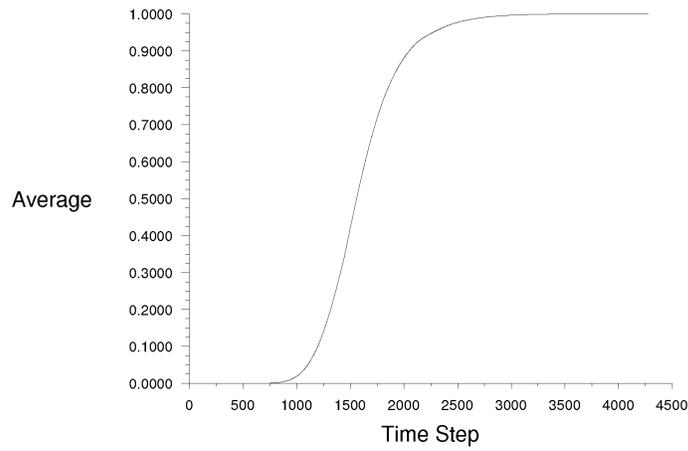
5 Dialysemodul

Es ist ein Hohlfasermodul zu simulieren, wie es auch zur Hämodialyse eingesetzt wird. Dabei wird hier von einer Anordnung ausgegangen, bei der das (verunreinigte) Blut in den Hohlfasern fließt, das Dialysat wird mantelseitig mit Dialyseflüssigkeit gespült.

Auch hier stellt sich wieder die Frage, ob alle Membranfasern im Dialysemodul mit der gleichen Geschwindigkeit durchströmt werden, da besondere Beanspruchung bei Blut aufgrund der zellulären Bestandteile vermieden werden muß. Dies kann wieder auf eine Frage der optimalen Verteilung am Eintritt zurückgeführt werden.

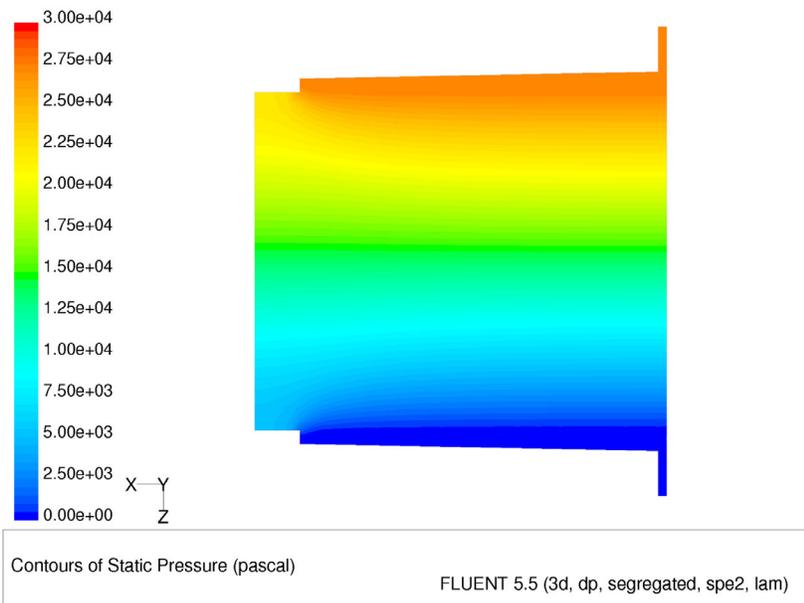
Zusätzlich ist noch die Strömung auf der Dialysatseite zu optimieren, um die Konzentration dialysatseitig so niedrig wie möglich zu halten und einen kontinuierlichen und effizienten Stofftransport zu gewährleisten.

Sämtliche Darstellungen wurden aus [3] entnommen, weitere Informationen zu dieser Hämodialyseanwendung findet man in [5].



Convergence history of Mass fraction of h2oc on outlet (Time=4.4950e+03)
 FLUENT 5.3 (3d, dp, segregated, spe2, lam, unsteady)

Abbildung 4: Durchbruchskurve



Contours of Static Pressure (pascal)
 FLUENT 5.5 (3d, dp, segregated, spe2, lam)

Abbildung 5: Druckprofil, statischer Druck in Pa

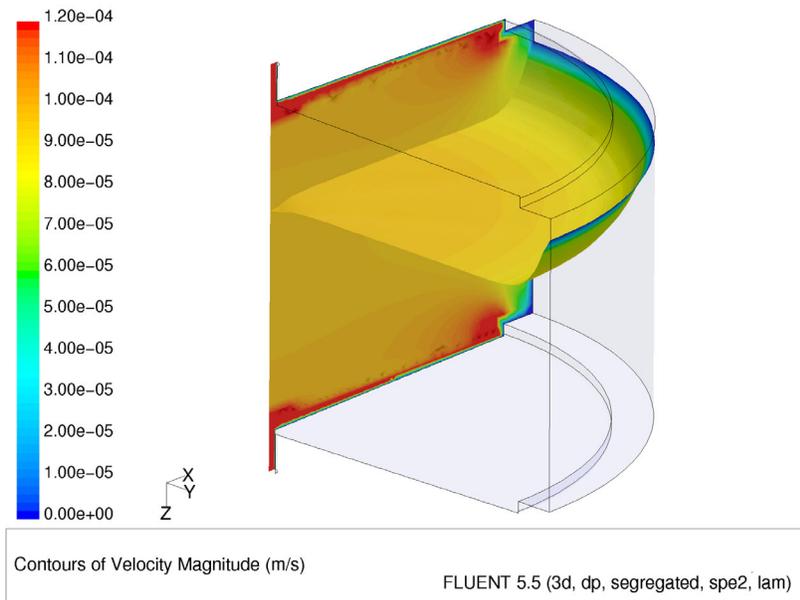


Abbildung 6: Iso-Fläche mit Mantel, Absolutgeschwindigkeit in m/s

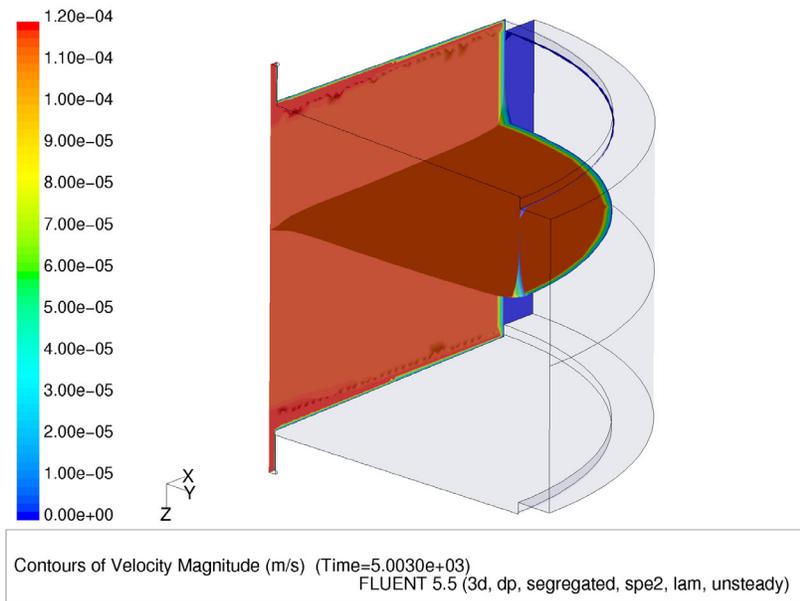


Abbildung 7: Iso-Fläche ohne Mantel, Absolutgeschwindigkeit in m/s

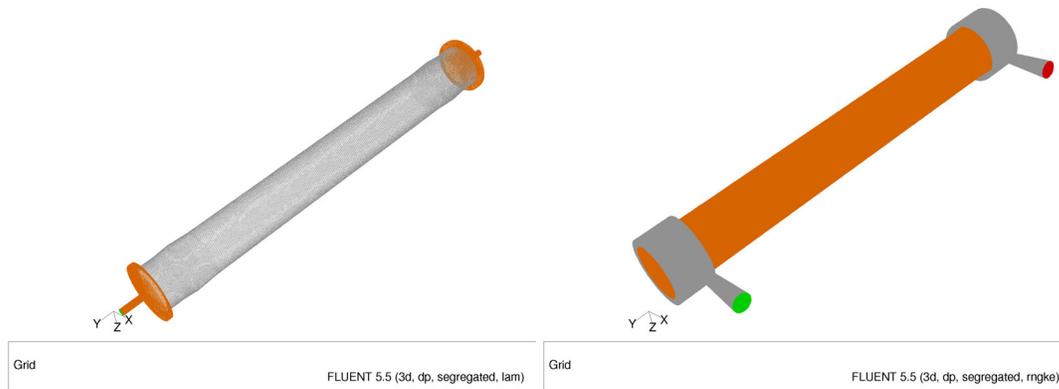


Abbildung 8: Gitter Dialysemodul (links Hohlfaserseite, rechts Mantelseite)

5.1 Geometrie

Im Gegensatz zur Implementierung des Chromatographiemoduls tritt hier zumindest auf der Dialysatseite nur eine Symmetrieebene auf, die in diesem Fall aber auch nicht genutzt wurde (Abbildung 8).

5.2 Parameter

Analog zum vorhergehenden Problem waren wieder Kennwerte für das poröse Ersatzmedium zu finden, wobei aufgrund der Struktur bei der Simulation der Hohlfasern anisotrope Widerstandskennwerte eingesetzt wurden.

5.3 Darstellungen und Auswertungen

Bei der Betrachtung der Anströmung der Hohlfasern zeigt sich analog zur Chromatographiesäule, daß in den Randzonen das Fluid deutlich langsamer strömt. Ebenso sieht man eine Zone, in welcher der einströmende Strahl an das Gebiet höheren Widerstandes anprallt, abgelenkt wird und Wirbelbereiche ausbildet (siehe Abbildung 9).

Mantelseitig merkt man im Umlaufkanal der Zuströmung (Abbildung 10), daß gegenüber des Eintrittes die niedrigste Geschwindigkeit auftritt. Demzufolge ist auch hier die Aufgabe auf das Separationsmedium asymmetrisch und kann zu Problemen führen.

Beide Effekte führen zu Ungleichverteilungen der Fluide und somit zu schlechterer Ausnützung des Membranmoduls.

6 Diskussion

Sehr gut behandeln lassen sich Probleme der klassischen Fluidodynamik, insbesondere Modifikationen der Anströmgeometrien. Durch Optimierung dieser kann eine günstigere Fluidverteilung im porösen Medium oder an den Dialysefasern erreicht werden, welche den Stoffaustausch begünstigt.

Berücksichtigung von Stoffaustausch ist in FLUENT über die Anwendung von Quellen- und Senkentermen möglich. Zeitliche und Konzentrationsabhängigkeit lassen sich nur auf dem Weg der UDF (user defined function) realisieren, welche in den obigen Fällen nicht zur Anwendung gebracht wurden. Bei Membranen ergibt sich zusätzlich noch die Betrachtung des Transmembranflusses.

Aus den Berechnungsergebnissen lassen sich Druck- und Geschwindigkeitsprofile ableiten, die in weiterer Folge bei Detailberechnungen zum Einsatz kommen können. Die Drücke können beispielsweise als

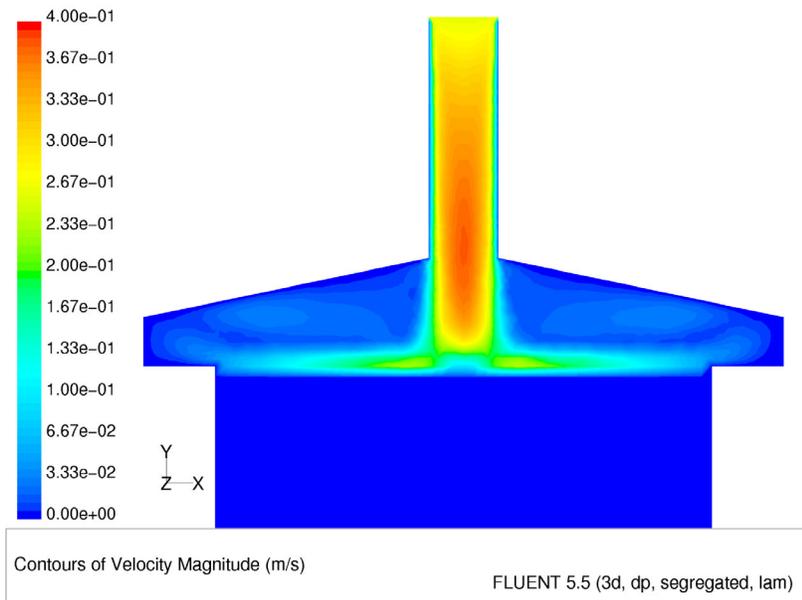


Abbildung 9: Anströmung Blutseite, Absolutgeschwindigkeit in m/s

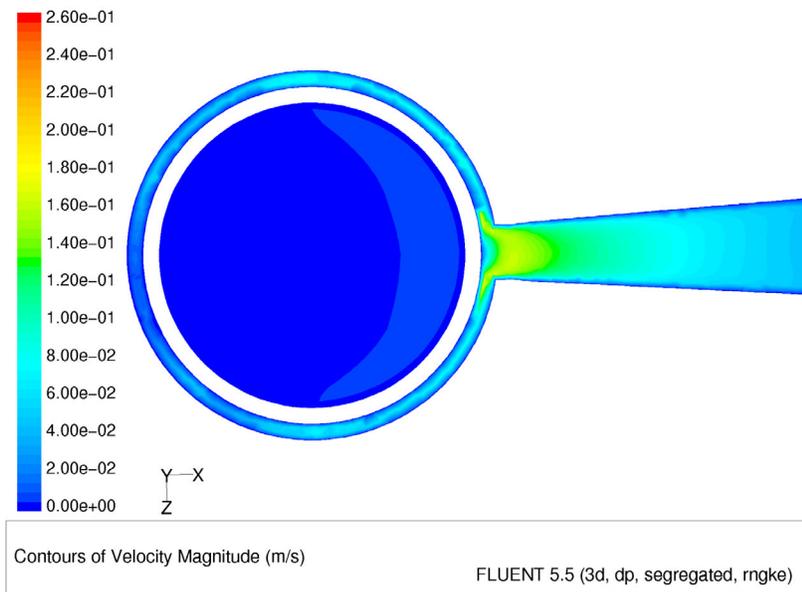


Abbildung 10: Verteilung im Umlaufring, Absolutgeschwindigkeit in m/s

Randbedingungen in feiner gemeshen Bereichen eingesetzt werden. Allerdings müßte auch in diesem Fall eine iterative Lösung erfolgen.

7 Ausblick

Für eine weitergehende Betrachtung kommen folgende Punkte in Frage:

- Anwendung weiterer Turbulenzmodelle
- Betrachtung der Auswirkung der Porosität der Säulenfüllungen
- Quell- und Senkenterme zur Simulation von Retention und Stoffaustausch
- Modifikation der Verteilerplatten

Literatur

- [1] Birtigh, A.; Lauschke, G.; Schierholz, W. F.; Beck, D.; Maul, C.; Gilbert, N.; Wagner, H. G.; Werninger, C. Y.: CFD in der chemischen Verfahrenstechnik aus industrieller Sicht; Chemie Ingenieur Technik (72), S. 175-193, April 2000
- [2] Harasek, M.; Paul, G.; Jordan, C.; Friedl, A.: CFD-Simulation of Preparative Chromatographic Columns: Effect of the Distributor and the Column Design on the Separation Performance. Institute of Chemical Engineering, Fuel and Environmental Technology, Vienna University of Technology, ECCE 3 - 3rd European Congress of Chemical Engineering, Nuremberg, 2001
- [3] Flannery, C. J.; Jordan, C.; Staudacher, M.; Schwarz, M.; Harasek, M.: Fluid Dynamics Simulation of Blood Filter; Forschungsbericht VTTH-01-FB060, Institut für Verfahrens-, Brennstoff- und Umwelttechnik, TU Wien, 2001
- [4] Fluent 5 User's Guide, Fluent Inc. 1998; Bände 1-4
- [5] Harasek, M.; Strobl, W.; Friedl, A.; Falkenhagen, D.: Modelling and Optimisation of Novel Membrane/Adsorbent Based Extracorporeal Blood Purification Devices by Computational Fluid Dynamics; Annual Conference 2001 of the European Society for Artificial Organs (ESAO 2001)